Zeitschrift für Kristallographie

ernational Journal for Structural, Physical,
d Chemical Aspects of Crystalline Materials

Editors-in-Chief

M. Buerger, Cambridge, MA · S. Haussühl, Köln
H. G. von Schnering, Stuttgart

Editorial Board

G. E. Bacon, Sheffield · E. F. Bertaut, Grenoble
U. K. E. Bonse, Dortmund · L. D. Calvert, Ottawa
P. Hartman, Utrecht · E. Hellner, Marburg/Lahn
F. Liebau, Kiel · A. Niggli, Zürich
M. Renninger, Marburg/Lahn · S. Rundqvist, Uppsala
K. Schubert, Stuttgart · L. A. Shuvalov, Moscow
Y. Takéuchi, Tokyo · B. J. Wuensch, Cambridge, MA

Volume 164 1983

R. Oldenbourg Verlag · München

© R. Oldenbourg Verlag, München 1983. – Printed in Germany. – Die in dieser Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Übersetzung, Nachdruck, Vervielfältigung auf photomechanischem oder ähnlichem Wege oder im Magnettonverfahren, Vortrag, Funk- und Fernsehsendung sowie Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen – auch auszugsweise – bleiben vorbehalten. All rights reserved (including those of translations into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form, by photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publishers. Werden von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen einzelne Vervielfältigungsstücke im Rahmen des § 54 UrhG hergestellt und dienen diese gewerblichen Zwecken, ist dafür eine Vergütung gem. den gleichlautenden Gesamtverträgen zwischen der Verwertungsgesellschaft Wort (ehemals Inkassostelle für urheberrechtliche Vervielfältigungsgebühren GmbH), Goethestr. 49, D-8000 München 2, und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V., dem Gesamtverband der Versicherungswirtschaft e.V., dem Bundesverband deutscher Banken e.V., dem Deutschen Sparkassen- und Giroverband und dem Verband der Privaten Bausparkassen e.V., an die VG Wort zu entrichten. Die Vervielfältigungen sind mit einem Vermerk über die Quelle und den Vervielfältiger zu versehen. Erfolgt die Entrichtung der Gebühren durch Wertmarken der VG Wissenschaft, so ist für jedes vervielfältigte Blatt eine Marke im Wert von DM 0,40 zu verwenden.

Herstellung: Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden

Vol. 164 No. 1/2 1983

R. Enjalbert, G. Guerch, F. Sournies, J.-F. Labarre, J. Galy
Cyclophosphazenes antitumoraux. Structure cristalline et géométrie moléculaire du 2,2,4,4-tetrakis(aziridinyl)-6,6-dichlorocyclotriphosphaza-1,3,5-triène, gem-$N_3P_3Az_4Cl_2$ **1**

M. Shoja, M. K. Kaloustian
The crystal structure of *trans*-2-isopropyl-1,3-dioxane-5-carbothioamide **13**

F. Pechar, W. Schäfer, G. Will
A neutron diffraction refinement of the crystal structure of natural natrolite, $Na_2Al_2Si_3O_{10} \cdot 2\,H_2O$ **19**

R. Herak, B. Prelesnik, M. Čurić, S. Djurić
The crystal structure of $Co(H_2PO_4)_2 \cdot 2\,H_3PO_4$ **25**

A. Lutts
A new method for determining lattice parameters from powder diffraction patterns of monoclinic crystals. The influence of systematic errors and its partial elimination **31**

M. Renninger
Investigations by double diffractometric topography. I. Fundamental considerations and experimental results on the imaging laws of lattice defects, specially for the Laue case **43**

A. Willgallis, H. Hartl
$(Zr_{0,33}Ti_{0,67})O_2$ – ein natürliches Zirkonium-Titanoxid mit α-PbO_2-Struktur **59**

S. Sasaki, H.-K. Chen, C. T. Prewitt, Y. Nakajima
Re-examination of "$P2_1/a$ coesite" **67**

S. Hansen, L. Fälth
The average structure of partially cesium exchanged nepheline hydrate I **79**

H. Krischner, O. Baumgartner, H. E. Maier, A. I. Saracoglu
Kristallstrukturen von $Rb_2Zn(N_3)_4$ und $Tl_2Zn(N_3)_4$ **89**

E. F. Bertaut
Similarity operators and displacive transitions. Application to the transition from the hexagonal NiAs to the orthorhombic MnP type **95**

I. A. Fanariotis, P. C. Christidis, P. J. Rentzeperis
The crystal structure of (triphenylphosphine)(nitrosyl)(O-cyclopentyldithiocarbonate)nickel **109**

Y. B. Kuo, W. Scheld, R. Hoppe
To the knowledge of the α-$LiFeO_2$ type: An examination of $LiScO_2$ and $NaNdO_2$ **121**

H. Bernotat-Wulf, W. Hoffmann
Die Kristallstruktur des Bleiniobats $Pb_{2,8}Nb_2O_{7,8}$ und ihre Verwandtschaft zum Pyrochlor-Typ **129**

M. Boualam, A. Gleizes
Synthèse et structure cristalline et moléculaire de l'aquabis(diphénylglyoximato)cuivre(II) **141**

Short Communications

P. Spinat, C. Brouty, A. Whuler
Crystal data for monomer forms of 2,4-hexadiyne-1,6-bis(butylcarboxymethylurethane) and 3,5 octadiyne-1,8-bis(butylcarboxymethylurethane) **153**

M. J. Cooper
The validity of the Rietveld method **157**

Vol. 164 No. 3/4 1983

J. Hauck, C. Schröck-Pauli
On the possibility of crystal structure determination of low temperature phases of hydrogen in *bcc* metals by electron diffraction **159**

A. Mosset, M. Abboudi, J. Galy
Complexes métalliques de l'acide rubéanique. I. Synthèse, structure moléculaire et cristalline d'un rubéanate de cuivre(I): $CuCl(C_2N_2S_2H_4)_{1.5}(H_2O)_{0.45}$ **171**

A. Mosset, M. Abboudi, J. Galy
Complexes métalliques de l'acide rubéanique. II. Etude structurale, par diffraction des rayons X, du rubéanate de cuivre(I): $CuCl(C_2N_2S_2H_4)$ **181**

A. Prodan, V. Marinković, N. Vene, B. Kurbus, F. W. Boswell
On structural relations between the CaO-SiO_2-H_2O phases **189**

W. Engel, N. Eisenreich
The phase transition IV/II of ammonium nitrate investigated by X-ray diffraction **211**

P. C. Christidis, P. J. Rentzeperis, A. Kirfel, G. Will
X-ray determination of the electron density distribution in monoclinic $Fe_2(SO_4)_3$ **219**

G. Heller, J. Schellhaas
Die Kristallstruktur von $Ni_{0.8}Mn_{0.2}(H_2O)_3[B_6O_7(OH)_6] \cdot C_2H_5OH \cdot 0.42\,H_2O$; feste Lösungen von Metall(II)-Ionen in Nickel-hexaborat **237**

H. Gies
Studies on clathrasils. III. Crystal structure of melanophlogite, a natural clathrate compound of silica **247**

A. Ben Salah, J. W. Bats, H. Fuess, A. Daoud
Crystal structure determination of the complexes of trimethylammonium chloride and mercury(II) chloride: $(CH_3)_3NHHgCl_3$, $\{(CH_3)_3NH\}_2HgCl_4$, and $(CH_3)_3NHHg_2Cl_5$ **259**

S. N. Patel, A. A. Balchin
Observation of intermediate phases during the lithium intercalation of TiX_2 (X = S, Se) **273**

L. Bohatý
Elektrooptische und elektrostriktive Eigenschaften von Bleitetraborat PbB_4O_7 **279**

B. N. Mehrotra
Anisotropy of thermal expansion of 0.85 $Na_2CrO_4 \cdot 0.15\ Na_2CO_3$ **285**

L. Bohatý, R. Fröhlich
Die Kristallstruktur von Rubidiumtartrat $Rb_2[(+)-C_4H_4O_6]$ **291**

C. A. Kavounis, P. J. Rentzeperis
The crystal structure of the (E,E)-9,10-bis(p,p'-bis-chlorophenylazo)-cis-decaline (PCPAD) **297**

M. T. Averbuch-Pouchot, A. Durif
Crystal structure of lead-tetrasodium trimetaphosphate: $PbNa_4(P_3O_9)_2$, Crystal data for $BaNa_4(P_3O_9)_2$ **307**

Zeitschrift für Kristallographie

ernational Journal for Structural, Physical,
d Chemical Aspects of Crystalline Materials

Editors-in-Chief

M. Buerger, Cambridge, MA · S. Haussühl, Köln
H. G. von Schnering, Stuttgart

Editorial Board

G. E. Bacon, Sheffield · E. F. Bertaut, Grenoble
U. K. E. Bonse, Dortmund · L. D. Calvert, Ottawa
P. Hartman, Utrecht · E. Hellner, Marburg/Lahn
F. Liebau, Kiel · A. Niggli, Zürich
M. Renninger, Marburg/Lahn · S. Rundqvist, Uppsala
K. Schubert, Stuttgart · L. A. Shuvalov, Moscow
Y. Takéuchi, Tokyo · B. J. Wuensch, Cambridge, MA

Volume 165 1983

R. Oldenbourg Verlag · München

© R. Oldenbourg Verlag, München 1983. — Printed in Germany. — Die in dieser Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Übersetzung, Nachdruck, Vervielfältigung auf photomechanischem oder ähnlichem Wege oder im Magnettonverfahren, Vortrag, Funk- und Fernsehsendung sowie Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen – auch auszugsweise – bleiben vorbehalten. All rights reserved (including those of translations into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form, by photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publishers. Werden von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen einzelne Vervielfältigungsstücke im Rahmen des § 54 UrhG hergestellt und dienen diese gewerblichen Zwecken, ist dafür eine Vergütung gem. den gleichlautenden Gesamtverträgen zwischen der Verwertungsgesellschaft Wort (ehemals Inkassostelle für urheberrechtliche Vervielfältigungsgebühren GmbH), Goethestr. 49, D-8000 München 2, und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V., dem Gesamtverband der Versicherungswirtschaft e.V., dem Bundesverband deutscher Banken e.V., dem Deutschen Sparkassen- und Giroverband und dem Verband der Privaten Bausparkassen e.V., an die VG Wort zu entrichten. Die Vervielfältigungen sind mit einem Vermerk über die Quelle und den Vervielfältiger zu versehen. Erfolgt die Entrichtung der Gebühren durch Wertmarken der VG Wissenschaft, so ist für jedes vervielfältigte Blatt eine Marke im Wert von DM 0,40 zu verwenden.

Herstellung: Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden

Vol. 165 No. 1–4 1983

G. A. Slack
The most-dense and least-dense packings of circles and spheres 1

K. Schubert
Stabilitätsproblem, Valenzproblem und Struktursystematik 23

T. K. Chattopadhyay, W. May, H. G. von Schnering, G. S. Pawley
X-ray and neutron diffraction study of the crystal structure of α-P_4S_3 47

T. Yamanaka, Y. Takéuchi
Order-disorder transition in $MgAl_2O_4$ spinel at high temperatures up to 1700°C 65

A. I. Saracoglu, H. Krischner, Ch. Kratky
Die Kristallstruktur des $Cs_5Ca_2(N_3)_9 \cdot 2\,H_2O$ 79

H. Krischner, A. I. Saracoglu, F. A. Mautner, Ch. Kratky
Die Kristallstruktur des $Cs_6Ca(N_3)_8 \cdot 2\,H_2O$ 85

J. Liebertz, S. Stähr
Zur Tieftemperaturphase von BaB_2O_4 91

P. K. Hon, O. W. Lau, L. Book, W. I. Stephen
The crystal and molecular structure of N,N'-ethylene-bis(trifluoroacetylpivalylmethaneiminato)copper(II), Cu[en(TPM)$_2$] 95

T.-F. Lai, T. C. W. Mak
Metal complexes of polycyclic tertiary amines. II. Crystal structure of hexamethylenetetramine-cadmium chloride-water (1/2/5) 105

A. Kirfel, G. Will, K. Recker, F. Wallrafen, G. Zhangshou
The crystal structure of lithium hydrogen malate, $LiC_4H_5O_5 \cdot C_4H_6O_5$ 117

H. Effenberger
Verfeinerung der Kristallstruktur des monoklinen Dikupfer(II)-trihydroxinitrates $Cu_2(NO_3)(OH)_3$ 127

E. F. Paulus, W. Rieper, D. Wagner
Molecular and crystal structure of the two hydrazone pigments N-(2-methylphenyl)-2-(2-methyl-phenyl-hydrazono)-3-oxo-butyramide and N-(2-methoxyphenyl)-2-(2-methoxy-phenylhydrazono-3-oxo-butyramide **137**

V. Krämer, B. Frick, D. Siebert
Structure refinement of cadmium thiogallate $CdGa_2S_4$ **151**

A. G. Papazoglou, P. J. Réntzeperis
The crystal structure of antimony telluroiodide, SbTeI **159**

G. Cascarano, C. Giacovazzo
One-phase seminvariants of first rank: I. Algebraic considerations **169**

J. B. Parise, R. D. Shannon, E. Prince, D. E. Cox
The crystal structures of the synthetic zeolites (Cs, K)-ZK5 and (Cs, D)-ZK5 determined from neutron powder diffraction data **175**

J. V. Smith
Enumeration of 4-connected 3-dimensional nets and classification of framework silicates: Combination of 4–1 chain and 2*D* nets **191**

M. Ledésert, J. C. Monier
Crystal structures of $KCdCl_3 \cdot H_2O$ and $KCdCl_3$ **199**

P. Engel, M. Gostojić, W. Nowacki
The crystal structure of pierrotite, $Tl_2(Sb,As)_{10}S_{16}$ **209**

P. Klüfers
Die Kristallstrukturen von $CsCo(CO)_4$ und $TlCo(CO)_4$ **217**

R. Allmann, D. Kucharczyk
Die Adduktverbindung des tetrameren Trimethylplatinjodids mit CCl_4, $[(CH_3)_3Pti]_4 \cdot CCl_4$ **227**

M. de Matheus, J. L. Briansó, X. Solans, G. Germain, J. P. Declercq
Crystal structures of tris(nitrate)tris(N,N-dimethylacetamide)Er(III) and tris(nitrate)tris(N,N-dimethylacetamide)Sm(III) **233**

A. Erdönmez, D. Ülkü
The crystal structure of dibromobis(3,5-dimethylpyridine)manganese(II) **241**

B. Dam, A. Janner
Morphological determination of modulated-cell parameters of Rb_2ZnBr_4 **247**

C. Rodellas, S. García-Blanco, A. Vegas
Crystal structure refinement of Jeremejevite ($Al_6B_5F_3O_{15}$) **255**

T. Balić-Žunić, P. Engel
Crystal structure of synthetic $PbTlAs_3S_6$ **261**

P. Román, M. E. Gonzalez-Aguado, C. Esteban-Calderón, M. Martinez-Ripoll, S. García-Blanco
Crystal structure of 3-methylpyridinium β-octamolybdate **271**

M. Shoja, M. K. Kaloustian
The crystal structure of *cis*-2-isopropyl-1,3-dioxane-5-carboxamide **277**

A. Whuler, P. Spinat, C. Brouty
Crystal data for monomer forms for 2,4 hexadiyne-1,6 bis-(p-chlorophenylurethane) and 4,6 dekadiyne-1,10 bis-(phenylurethane) **283**

S. Haussühl, D. Mateika
Temperature and pressure derivatives of the elastic constants of hexagonal $Ba_{0.75}Al_{11}O_{17.25}$ **289**

W. Joswig, Y. Takéuchi, H. Fuess
Neutron-diffraction study on the orientation of hydroxyl groups in margarite **295**

Short Communications

H. G. von Schnering, D. Vu, K. Peters
Refinement of the scheelite-type structures of $CaZnF_4$ and $SrZnF_4$ **305**

L. Born
Crystal structure of 1,2-ethanediyl-bis-[4-(phenylmethyl)-phenylcarbamate] **309**

B. U. Köhler, M. Jansen
Synthesis and crystal structure of 2H—$CuAlO_2$ **313**